金属の Pauli 帯磁率の自由電子モデルからのズレ I（一般論）

川　村　　　清（東大理）

（6月18日受理）

1　Na のバンド計算[1] の結果を見ると、フエルミ面近くで、電子の質量はほとんど自由電子の値に近いことが知られている。それに対して、種々の実験から求められる電子の質量は、実験の種類によつて異つた値を示し、しかも、自由電子の質量から大きくはずれる。たとえば、比熱から逆算される "thermal mass" は $1.27m_0$ [2](m_0 は自由電子の質量) であり、Pauli 帯磁率から測定される "spin mass" は $1.7m_0$[3] である。これらの mass shift は、これまでにも、多くの人々によつて研究されて来たが、前者の大部分は electron-phonon 相互作用による[9],[10] ものと思われる。Coulomb correlation は、後者に[ ] 効くと考えられる。

しかし、これまでの研究は、あくまでも、Coulomb correlation と electron-phonon 相互作用を別々に取り扱つて来たものであり、双方が同時に存在する系ではどうなるのか、cross effect を含めて、チエツクしておく必要はありそうである。そこで、ここに、最近計算しつつあることを中間報告し、合わせて、この方面でこれまで多くの貢献をされて来た先輩諸兄の厳しい批判を仰ぎたいと思う。

2　まず、金属内電子の Pauli 帯磁率を、Landau[4] の導入した correlation function を使つて書きあらわす。結果は Landau の現象論と同じではあるが、オ一原理から導びくにあたつて、まず Kadanoff-Baym[5], Prange-Kadanoff[6] の方法で spin に対する kinetic equation を求める。

次のような "physical Green 関数" を定義する[5]。

$$\mathcal{G}_\sigma(1,1':\mathrm{H}) = \frac{1}{i} < T(\phi_{\mathrm{H}\sigma}(1)\phi^+_{\mathrm{H}\sigma}(1')) >$$

$$g^{>}(1,1':H)=\frac{1}{i}<\phi_{H\sigma}(1)\,\phi^{+}_{H\sigma}(1')>$$

$$g^{<}(1,1':H)=\pm\frac{1}{i}<\phi^{+}_{H\sigma}(1')\,\phi_{H\sigma}(1)> \tag{1}$$

ここで

$$\phi_{H\sigma}(1)=u^{+}(t_1)\,\phi_\sigma(1)\,u(t_1)$$

$$u(t_1)=T\{\exp[-i\int_{-\infty}^{t_1}d2\,H(2)m(2)]\} \tag{2}$$

Tは time-ordering operator ,

$$m(2)=\phi^{+}_{\uparrow}(2)\;\phi_{\uparrow}(2)-\phi^{+}_{\downarrow}(2)\;\phi_{\downarrow}(2) \tag{3}$$

は、magnetic moment operator, H(2) は磁場である。(Bohr mahneton =+1 にした) この "physical Green 関数" に対して、例えばつぎのような運動方程式が成立する。

$$[i\frac{\partial}{\partial t_1}+\frac{\nabla_1^2}{2m}-\eta_\sigma H(1)]\,g^{<}_{\sigma}(1,1':H)$$

$$=\int_{-\infty}^{t_1}d\bar{1}\,[\Sigma^{>}_{\sigma}(1,\bar{1}:H)-\Sigma^{<}_{\sigma}(1,\bar{1}:H)]\,g^{<}_{\sigma}(\bar{1},1':H)$$

$$-\int_{-\infty}^{t_1'}d\bar{1}\,\Sigma^{<}(1,\bar{1}:H)\,[g^{>}_{\sigma}(\bar{1},1':H)-g^{<}_{\sigma}(\bar{1},1':H)] \tag{4-a}$$

$$[-i\frac{\partial}{\partial t_1'}+\frac{\nabla_{1'}^2}{2m}-\eta_\sigma H(1')]\,g^{<}_{\sigma}(1,1':H)$$

$$=\int_{-\infty}^{t_1}d\bar{1}\,[g^{>}_{\sigma}(1,\bar{1}:H)-g^{<}_{\sigma}(1,\bar{1}:H)]\,\Sigma^{<}(\bar{1},1':H)$$

$$-\int_{-\infty}^{t_1'}d\bar{1}\,(1,\bar{1}:H)\,[\Sigma^{>}(\bar{1},1':H)-\Sigma^{<}(\bar{1},1':H)] \tag{4-b}$$

両辺を差し引きし、重心座標

$$\mathbf{R}=(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)/2 \qquad T=(t_1+t_1')/2$$

及び相対座標

$$\mathbf{r}=(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\ ,\qquad t=t_1-t_2$$

を導入し、更に $\mathbf{r}$ ，t に関してフーリエ変換すると、外場が時間的空間的にゆっくり変動するとして、

$$[\omega-(p^2/2m)-\eta_\sigma H(\mathbf{R},T)-\mathrm{Re}\,\Sigma_\sigma(\mathbf{P},\omega;\mathbf{R},T)\ ,\ \mathcal{G}_\sigma^<(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},T)]$$

$$+[\mathrm{Re}\,\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},T),\ \Sigma_\sigma^<(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},T)]$$
$$=-\Sigma_\sigma^>(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},T)\,\mathcal{G}_\sigma^<(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},T)$$
$$+\Sigma_\sigma^<(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},T)\,\mathcal{G}_\sigma^>(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},T) \tag{5}$$

ここで

$$[A,B]=\frac{\partial A}{\partial\omega}\frac{\partial B}{\partial T}-\frac{\partial A}{\partial T}\frac{\partial B}{\partial\omega}$$
$$-\nabla_P A\cdot\nabla_{\mathbf{R}}B+\nabla_R A\cdot\nabla_P B \tag{6}$$

を定義した。(5)から、 Kadanoff-Baym[5]と全く同じ手続きで、次のKinetic equation が求まる。

$$\partial n_\sigma/\partial,T+\nabla_{\mathbf{P}}E_\sigma\cdot\nabla_{\mathbf{R}}n_\sigma-\nabla_{\mathbf{R}}E_\sigma\cdot\nabla_{\mathbf{P}}n_\sigma$$
$$-\eta_\sigma\nabla_{\mathbf{R}}H\cdot\nabla_{\mathbf{P}}n_\sigma=0 \tag{7}$$

(7)で quasi-particle の energy $E_\sigma(\mathbf{P},\mathbf{R},T)$ は

$$\omega=(P^2/2m)+\eta_\sigma H(\mathbf{R},T)+\mathrm{Re}\,\Sigma_\sigma(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},T) \tag{8}$$

を ω について解いてその解を

$$\omega=E_\sigma(\mathbf{P},\mathbf{R},T)+\eta_\sigma H(\mathbf{R},T) \tag{9}$$

とおいて与えられる。すなわち、電子の energy から Zeeman energy を差し引いた部分である。quasi-particle の distribution function は、

差し当り

$$\mathscr{G}^{<}_{\sigma}(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},\mathrm{T})=2\pi\,\delta\Big[\omega-\frac{p^2}{2m}-\eta_\sigma \mathrm{H}(\mathbf{R})$$

$$+\mathrm{Re}\,\Sigma_\sigma(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},\mathrm{T})\Big]\,f_\sigma(\mathbf{P},\omega:\mathbf{R},\mathrm{T}) \tag{10}$$

で定義される f_σ の ω として(9)を代入したもので与える。

3　(10)にあるようにフエルミ面近傍の spectral function が δ－関数の様に sharp であれば (10)を経て、quasi-particle の分布関数を定義出来るが、electron-phonon 相互作用のあるときは、高温で spectral function は大きな巾をもつ。そのようなときは、もし、Coulomb 相関を無視するなら、Prange-Kadanoff[6] がやつた手続で kinetic equation を求めることが出来る。結果は、衝突項を無視する限り(7)と全く同じになるから、途中は省略する。

4　磁場は z－軸正の方向を向いているとして、(7)から

$$\frac{\partial(n_\uparrow-n_\downarrow)}{\partial \mathrm{T}}+(\nabla_{\mathbf{P}}E_\uparrow\cdot\nabla_{\mathbf{R}}n_\uparrow-\nabla_{\mathrm{P}}E_\downarrow\cdot\nabla_{\mathrm{R}}n_\downarrow)$$

$$-(\nabla_{\mathbf{R}}E_\uparrow\cdot\nabla_{\mathbf{P}}n_\uparrow-\nabla_{\mathbf{R}}E_\downarrow\cdot\nabla_{\mathbf{P}}n_\downarrow)$$

$$-(\nabla_{\mathbf{R}}\mathrm{H}\cdot\nabla_{\mathbf{P}}n_\uparrow+\nabla_{\mathbf{R}}\mathrm{H}\cdot\nabla_{\mathbf{P}}n_\downarrow)=0 \tag{11}$$

linear theory の範囲で、(11)は

$$\frac{\partial m}{\partial \mathrm{T}}+\mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{R}}m$$

$$-\frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{R}}(E_\uparrow-E_\downarrow)\cdot\nabla_{\mathbf{P}}n_0-\nabla_{\mathbf{R}}\mathrm{H}\cdot\nabla_{\mathbf{P}}n_0=0 \tag{12}$$

ここで

$$m=n_\uparrow-n_\downarrow \tag{13}$$

を定義した。また、n_0 は、平衡状態の分布関数で

$$n_0(\mathbf{P}) = [1 + \exp\{(E_{\mathbf{P}} - \mu)/T\}] \tag{14}$$

P 一空間での電子系の分布の変化は、quasi-particle の energyの変化を次のように与える[4]。

$$\delta E_{p\sigma} = \Sigma_{\sigma'} \int \frac{d\mathbf{P}'}{(2\pi)^3} f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{P}, \mathbf{P}')\, \delta n_{\sigma'} \tag{15}$$

correlation function を

$$f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{P}, \mathbf{P}') = \phi(\mathbf{P}, \mathbf{P}') + (\sigma \cdot \sigma')\varphi(\mathbf{P}, \mathbf{P}') \tag{16}$$

と分解すると、(12)は

$$\partial m / \partial T + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} m(\mathbf{P}) - \nabla_{\mathbf{R}} H \cdot \nabla_{\mathbf{P}} n_0 - {}_{\mathbf{R}}\int \frac{d\mathbf{P}'}{(2\pi)^3} \varphi(\mathbf{P}, \mathbf{P}')\, m(\mathbf{P}' \cdot \mathbf{R}) \cdot \nabla_{\mathbf{P}} n_0 = 0 \tag{17}$$

外場Hが $\exp[i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{R})]$ に比例するとして

$$(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})\, m(\mathbf{P}, \mathbf{k}, \omega) - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}\, H(\mathbf{k}, \omega) \frac{\partial n_0}{\partial E_p} + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \frac{\partial n_0}{\partial E_p} \int \frac{d\mathbf{P}'}{(2\pi)^3} \varphi(\mathbf{P}, \mathbf{P}')\, m(\mathbf{P}', \mathbf{k}, \omega) = 0 \tag{18}$$

(18)は

$$\begin{cases} m(\mathbf{P}) = \dfrac{\partial n_0}{\partial E_p} \sum\limits_{n,m} N_{n,m} P_n^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi} \\ \varphi(\mathbf{P}, \mathbf{P}') = Z^{-1} \sum\limits_{l=0}^{\infty} (2\ell + 1) B_l P_l(\cos\theta_{p,p'}) \end{cases} \tag{19}$$

とおいて、普通の方法[7]で解ける。(Zは Fermi 面上の quasi-particle の状態密度) 一方、全磁化は

$$M = -\int \frac{d\mathbf{P}}{(2\pi)^3} m(\mathbf{P}) = Z N_{0,0} \tag{20}$$

(19)を(17)に代入し、$\omega=0$とおくと

$$N_{0,0}=H/(1+B_0) \tag{21}$$

(20)，(21)から、帯磁率と自由電子のそれとの比を求めると、

$$\chi/\chi_0=(m^*/m)/(1+B_0) \tag{22}$$

(m^*/m)は、Fermi 面の所の状態密度が、自由電子からずれることによつて出て来た。

Coulomb correlation のみがあるときは[4]

$$m^*/m=1+A_1 \tag{23}$$

と与えられる。(A_lは(16)の$\varphi(\mathbf{P},\mathbf{P}')$を(19)のようにLegendre展開したときの係数である）故にこの場合

$$\chi/\chi_0=(1+A_1)/(1+B_0) \tag{24}$$

となり、Landau の現象論と一致する。

一方、electron-phonon 相互作用では[6]

$$m^*/m=(1-A_0)^{-1} \tag{25}$$

となり、またMigdal 近似では$A_l=B_l$ 故

$$\chi/\chi_0=(1-A_0^2)^{-1}\cong 1 \tag{26}$$

これは、Quinn が、摂動論を使った結果と一致している。[8]

5　実際の金属では、Coulomb correlation と electron-phonon 相互作用が共存しており、そのような system は、m^*/mを、単独の correlation function で書けるかどうかは、(23)，(24)を比べて見ても疑問である。更に、両者が共存する系では、correlation function が、どのように変形されるか etc. の問題が出て来る。これらについては、一体の Green 関数に入つて来る self-energy-part を近似的に計算するというやつかいなものに

なるので、改めて、別稿で検討することにする。

最後に、貴重な討論をして下さつた、阿部先生、田中実氏、桜井明夫氏に感謝します。

文　献

(1) F.S.Ham: Phys. Rev. 128 82, 2524 (1962)
(2) D.L.Martin: Phys. Rev. 124 438 (1961)
(3) R.T.Schumacher and W.E.Vehse, J. Phys. Soc. Japan 17 Supplement B-1 (1962) p.460
(4) L.D.Landau: Soviet Phys. JETP. 3, 920 (1957)
(5) L.P.Kadanoff and G.Baym: "Quantum Statistical Mechanics"
(6) L.E.Prange and L.P.Kadanoff: Phys. Rev. 134, A566 (1964)
(7) S.Misawa: Prog. Theor. Phys., 30 786 (1963)
(8) J.J.Quinn: "Fermi Surface" Proc. of the International Conference at Cooperstown.
(9) S.Nakajima and M.Watabe: Prog. Theor. Phys. 29 341 (1963)
(10) M.Watabe: Prog. Theor. Phys. 29 519 (1963)